



TITLE:

微分作用素を用いたレゾルベントの留数解析と行列のスペクトル分解 (Computer Algebra : Design of Algorithms, Implementations and Applications)

AUTHOR(S):

田島, 慎一

CITATION:

田島, 慎一. 微分作用素を用いたレゾルベントの留数解析と行列のスペクトル分解 (Computer Algebra : Design of Algorithms, Implementations and Applications). 数理解析研究所講究録 2012, 1814: 17-28

ISSUE DATE:

2012-10

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/194556>

RIGHT:

微分作用素を用いたレゾルベントの留数解析と 行列のスペクトル分解

田島 慎一

筑波大学大学院数理物質科学研究科*

SHINICHI TAJIMA

GRADUATE SCHOOL OF PURE AND APPLIED SCIENCES, UNIVERSITY OF TSUKUBA

1 序

レゾルベントはスペクトル理論の基礎となる概念であり函数解析学において様々な応用を持つ重要な概念である. このレゾルベントの概念を有限次元ベクトル空間における線形写像に対し適用すると, 正方行列のスペクトル分解を与える公式を容易に導けることはよく知られている. 即ち, A を n 次正方行列, E を n 次単位行列とし, 行列 A の相異なる固有値を $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_s$ とおき, 行列 A のレゾルベント $(\lambda E - A)^{-1}$ の極 $\lambda = \alpha_i$ ($i = 1, 2, \dots, s$) におけるローラン展開の 1 位の係数行列を P_{α_i} , 2 位の係数行列を D_{α_i} とおくと, 行列 A のスペクトル分解はこれらの係数行列 $P_{\alpha_i}, D_{\alpha_i}$ ($i = 1, 2, \dots, s$) により与えられる ([5]).

論文 [16] では, レゾルベントに関するこれらの事柄に基づくことで, 整数 (あるいは有理数) を成分に持つ正方行列でその特性多項式が既約であるものに対し, 行列のスペクトル分解を求めるアルゴリズムを導出した. また, 論文 [17] で, このアルゴリズムが並列化可能であることを示し, 論文 [6] において, アルゴリズムの並列化を実際に行い, その計算効率が極めて良いことを示した. 論文 [3] では, 行列の最小多項式が幾つかの重複因子からなる場合を考察し, 重複度が 4 以下である因子に対してスペクトル分解行列を求めるアルゴリズムを与えた.

これらのアルゴリズムはいずれも, 行列 A の最小多項式 $f(\lambda) = \pi_A(\lambda)$ (もしくは特性多項式 $\chi_A(\lambda)$) に対し, $\psi(x, y)$ を $f(x) - f(y) = \psi(x, y)(x - y)$ を満たす多項式としたとき, $\Psi(A, \lambda) = \psi(A, \lambda E)$ と置くと, レゾルベントが

$$(\lambda E - A)^{-1} = \frac{\Psi(A, \lambda)}{f(\lambda)}$$

と表現出来ることを用いて得たものである. 本稿では, まず, 最小多項式の代わりに最小消去多項式を用いる事でこれらの計算アルゴリズムを改良することが可能であることを

*tajima@math.tsukuba.ac.jp

示す. 次に, スペクトル分解を計算するために用いる最小消去多項式を求める方法について考察する. 最後に, 微分作用素を用いることで, 行列のスペクトル分解を求めるアルゴリズムが構成可能となることを示す.

2 レゾルベントと最小消去多項式

行列 A は 整数 (もしくは有理数) を成分に持つ $n \times n$ 正方行列とする. まず, 最小消去多項式 の概念を導入するために, 幾つかの記号を準備することからはじめる. いま, $1 \leq j \leq n$ なる各 j に対し, 第 j 成分のみ 1 に等しく他の成分は全て 0 であるような n 次元基本単位ベクトルを e_j で表す. また, $I = \{1, 2, \dots, n\}$ の部分集合 $J \subset I$ に対し, $e_j, j \in J$ なる基本単位ベクトルたちを横に並べることで作られる行列を E_J で表す.

有理数係数の多項式全体のなす環 $K[\lambda]$ におけるイデアル

$$\text{Ann}_{K[\lambda]}(E_J) := \{p(\lambda) \mid p(A)E_J = 0\}$$

の monic な生成元を $\pi_{A,J}(\lambda)$ で表し, 行列 A の J に関する最小消去多項式と呼ぶ. 最小消去多項式 $\pi_{A,J}(\lambda)$ に対し, $\psi_J(x, y)$ を

$$\pi_{A,J}(x) - \pi_{A,J}(y) = \psi_J(x, y)(x - y)$$

なる多項式として定義し, 更に行列 $\psi_J(A, \lambda E)$ を $\Psi_J(A, \lambda)$ と略記すると, $\pi_{A,J}(A)E_J = 0$ が成り立つことから

$$(\lambda E - A)^{-1}E_J = \frac{1}{\pi_{A,J}(\lambda)}\Psi_J(A, \lambda)E_J$$

を得る.

いま, $I = \{1, 2, \dots, n\}$ を条件 $J \cup K = I, J \cap K = \emptyset$ を満たす J, K に分割したとする. J, K に関する最小消去多項式を用いることで次を得る.

$$(\lambda E - A)^{-1}E_J = \frac{1}{\pi_{A,J}(\lambda)}\Psi_J(A, \lambda)E_J,$$

$$(\lambda E - A)^{-1}E_K = \frac{1}{\pi_{A,K}(\lambda)}\Psi_K(A, \lambda)E_K.$$

最小多項式 $\pi_A(\lambda)$ は, $\pi_{A,J}(\lambda), \pi_{A,K}(\lambda)$ の最小公倍多項式であるが, 特に, $\pi_{A,J}(\lambda), \pi_{A,K}(\lambda)$ は共に, 最小多項式 $\pi_A(\lambda)$ を割り切る. このことから, I を分割することによりスペクトル分解行列の計算が軽減される可能性があることが分かる. そこで次に, どのような分割を行えば, 実際にスペクトル分解の計算量を減らすことができるようになるかについて考える.

行列 A の特性多項式 $\chi_A(\lambda)$ の因数分解を

$$\chi_A(\lambda) = f_1(\lambda)^{m_1} f_2(\lambda)^{m_2} \cdots f_q(\lambda)^{m_q}$$

各 $j \in I$ に関する最小消去多項式の因数分解を

$$\pi_{A,j}(\lambda) = f_1(\lambda)^{r_{j,1}} f_2(\lambda)^{r_{j,2}} \cdots f_q(\lambda)^{r_{j,q}}$$

とする. ここで, 因子 $f_p(\lambda)$ に注目し,

$$J_p = \{j \mid r_{j,p} \geq 1\}, \quad K_p = \{k \mid r_{k,p} = 0\}$$

とおく. この時, 分割 J_p, K_p に対応する最小消去多項式を用いると

$$(\lambda E - A)^{-1} E_{J_p} = \frac{1}{\pi_{A,J_p}(\lambda)} \Psi_{J_p}(A, \lambda) E_{J_p}$$

$$(\lambda E - A)^{-1} E_{K_p} = \frac{1}{\pi_{A,K_p}(\lambda)} \Psi_{K_p}(A, \lambda) E_{K_p}$$

を得る. いま, $f_p(\alpha) = 0$ なる固有値 $\lambda = \alpha$ に対するスペクトル分解行列を P_α, D_α とおく. 最小消去多項式 $\pi_{A,K_p}(\lambda)$ は因子 $f_p(\lambda)$ を含まないことから, 第2式の右辺は $\lambda = \alpha$ で正則であることが直ちに分かる. 従って, $P_\alpha E_{K_p} = D_\alpha E_{K_p} = 0$ が成立する.

この事は, 因子 $f_p(\lambda)$ に対するスペクトル分解行列を求めるには, 第1式を用いて, 列集合 J_p 上でのみ計算を行えばよいことを意味する. いままで述べた事は, 次のように纏めることができる.

「レゾルベントの概念を用いて行列のスペクトル分解を求める際は, 行列の最小多項式を計算に用いるより, 特性多項式の各因子 $f_p(\lambda)$ 毎に, 対応する最小消去多項式 $\pi_{A,J_p}(\lambda)$ を用いて計算する方が, スペクトル分解行列自体を求める際の計算量が少ない。」

3 最小消去多項式

n 次正方行列 A とその特性多項式 $\chi_A(\lambda)$ の因数分解

$$\chi_A(\lambda) = f_1(\lambda)^{m_1} f_2(\lambda)^{m_2} \cdots f_q(\lambda)^{m_q}$$

が与えられたとする. このとき, 指定された一つの $j (1 \leq j \leq n)$ に対し, その最小消去多項式 $\pi_{A,j}(\lambda)$ を求めることは比較的容易に行うことができる. しかし, この計算を, ひとつひとつの $j = 1, 2, \dots, n$ に対して行い, $\pi_{A,j}(\lambda), j = 1, 2, \dots, n$ を全て求めるとすると相当量の計算となるため, 最小消去多項式の計算法としては実用性に乏しいものとなる. 従って, 前の節で提案したスペクトル分解の計算法を計算効率の良いアルゴリズムとして実現するためには, 最小消去多項式 $\pi_{A,j}(\lambda), j = 1, 2, \dots, n$ を効率よく求める新たな計算手法を考案することが必要になる. そこでこの節では, 最小消去多項式を効率的に求めるための計算法について考える.

まず, 幾つかの記号を準備しておく. $1 \leq p \leq q$ なる p に対し, 特性多項式 $\chi_A(\lambda)$ の因子 $f_p(\lambda)$ 以外の因子の積を

$$g_p(\lambda) = f_1(\lambda)^{m_1} f_2(\lambda)^{m_2} \cdots f_{p-1}(\lambda)^{m_{p-1}} f_{p+1}(\lambda)^{m_{p+1}} \cdots f_q(\lambda)^{m_q}$$

とおき, さらに, 行列 G_p を $G_p = g_p(A)$ で定める. $F_p = f_p(A)$ と略記する.

最小消去多項式

$$\pi_{A,j}(\lambda) = f_1(\lambda)^{r_{j,1}} f_2(\lambda)^{r_{j,2}} \cdots f_q(\lambda)^{r_{j,q}}$$

の因子 $f_p(\lambda)$ の指数 $r_{j,p}$ は次により特徴付けられる.

- $r_{j,p} = 0$ iff $G_p \mathbf{e}_j = 0$.
- $r_{j,p} = k$ iff $G_p \mathbf{e}_j \neq 0, G_p F_p \mathbf{e}_j \neq 0, \dots, G_p F_p^{k-1} \mathbf{e}_j \neq 0, G_p F_p^k \mathbf{e}_j = 0$.

いま, n 次元横ベクトル u に行列 G_p を右から施して得られる横ベクトル uG_p を $w_p^{(0)} = (w_{p,1}^{(0)}, w_{p,2}^{(0)}, \dots, w_{p,n}^{(0)})$ で表す. 同様に, n 次元横ベクトル $uG_p F_p^k$ を $w_p^{(k)} = (w_{p,1}^{(k)}, w_{p,2}^{(k)}, \dots, w_{p,n}^{(k)})$ で表す. このとき, $G_p F_p^k \mathbf{e}_j = 0$ ならば, $w_{p,j}^{(k)} = 0$ となることは明らかである. これらのことに注目すると, 最小消去多項式候補を求めるアルゴリズムを次のように導出できる.

まず, ランダムに生成させた整数を成分に持つ n 次元横ベクトル u を作る. この横ベクトルに G_p を右から施し, ベクトル $w_p^{(0)}$ を求める. $w_p^{(k+1)} = w_p^{(k)} F_p$ により逐次, ベクトル $w_p^{(k)}, k = 1, 2, \dots, m_p$ を計算する.

注意 一般に, ベクトル u に多項式 $f(\lambda)$ が定める行列多項式 $F = f(A)$ を施す場合, ホーナー法で $F = f(A)$ を計算し, その結果と u の積を求めるのではなく, ベクトル u に対し, ホーナー法に即したやり方で行列 A を逐次施すことでベクトル uF を計算するようにする. これにより, 行列と行列の積を計算することなく, ベクトルと行列の積計算のみで $uf(A)$ を求めることができる.

さて, これらのデータより, n 個の非負整数を成分にもつ横ベクトル $\rho_p = (\rho_{p,1}, \rho_{p,2}, \dots, \rho_{p,n})$ を次のように定める.

- $w_{p,j}^{(0)} = 0$ ならば $\rho_{p,j} = 0$
- $w_{p,j}^{(0)} \neq 0, \dots, w_{p,j}^{(k-1)} \neq 0, w_{p,j}^{(k)} = 0$ ならば $\rho_{p,j} = k$

この時, 明らかにつぎが成立する.

補題 $r_{j,p} \geq \rho_{p,j}$ が成り立つ.

従って, $\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_p, \dots, \rho_q$ を求め

$$\pi'_{A,j}(\lambda) = f_1(\lambda)^{\rho_{1,j}} f_2(\lambda)^{\rho_{2,j}} \cdots f_q(\lambda)^{\rho_{q,j}}$$

と置けば, 多項式 $\pi'_{A,j}(\lambda)$ は最小消去多項式 $\pi_{A,j}(\lambda)$ を割り切る. この多項式多項式 $\pi'_{A,j}(\lambda), j = 1, 2, \dots, n$ のことを最小消去多項式候補とよぶことにする. 最小消去多項式候補は, ベクトル u の作り方に依存しているが, このベクトル u はランダムに生成した整数を成分に持つベクトルであるので, 実際にはほとんどの場合, 最小消去多項式候補は最小消去多項式と一致する.

さて, $\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_q$ を求めるには, まず, $w_1^{(0)} = uG_1, w_2^{(0)} = uG_2, \dots, w_q^{(0)} = uG_q$ を計算しておく必要がある. ここで, G_1, G_2, \dots, G_q は

$$\begin{aligned} G_1 &= F_2^{m_2} F_3^{m_3} \dots F_q^{m_q} \\ G_2 &= F_1^{m_1} F_3^{m_3} \dots F_q^{m_q} \\ &\vdots \\ &= \dots \\ &\vdots \\ &= \dots \\ G_q &= F_1^{m_1} F_2^{m_2} \dots F_{q-1}^{m_{q-1}} \end{aligned}$$

であることから明らかなように, 互いに殆ど同じ因子から構成されている. この点に注目し $w_1^{(0)}, w_2^{(0)}, \dots, w_q^{(0)}$ を求める際に重複した計算をなるべく避けることで, 効率化を図るようにする. 例えば, 因子数 q が 8 である場合, ベクトル u より $uF_5^{m_5} F_6^{m_6} F_7^{m_7} F_8^{m_8}$ を求め, 次に, このベクトルに $F_3^{m_3} F_4^{m_4}$ と $F_1^{m_1} F_2^{m_2}$ を施すことで $(uF_5^{m_5} F_6^{m_6} F_7^{m_7} F_8^{m_8}) F_3^{m_3} F_4^{m_4}$ と $(uF_5^{m_5} F_6^{m_6} F_7^{m_7} F_8^{m_8}) F_1^{m_1} F_2^{m_2}$ を求め, 更に, 前者に $F_2^{m_2}$ と $F_1^{m_1}$ 後者に $F_4^{m_4}$ と $F_3^{m_3}$ を夫々施せば, uG_1, uG_2, uG_3, uG_4 , 即ち, $w_1^{(0)}, w_2^{(0)}, w_3^{(0)}, w_4^{(0)}$ を構成できる. $w_5^{(0)}, w_6^{(0)}, w_7^{(0)}, w_8^{(0)}$ を作るには, ベクトル u より $uF_1^{m_1} F_2^{m_2} F_3^{m_3} F_4^{m_4}$ を求めた後, 先程と同様な計算を行えばよいことになる. この方法を用いることにより, $w_1^{(0)}, w_2^{(0)}, \dots, w_q^{(0)}$ を求める際の計算の負荷を軽減させることができる. この例では, $w_1^{(0)}, w_2^{(0)}, w_3^{(0)}, w_4^{(0)}$ の計算と $w_5^{(0)}, w_6^{(0)}, w_7^{(0)}, w_8^{(0)}$ の計算は全く独立である. この点に注目すると, 一般に $w_1^{(0)}, w_2^{(0)}, \dots, w_q^{(0)}$ を求める計算は並列化することも可能であることが分かる.

各 ρ_p を n 次元横ベクトルと見做し, $\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_p, \dots, \rho_q$ を縦一列に並べ, 行列 P を

$$P = \begin{pmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \\ \vdots \\ \rho_q \end{pmatrix}$$

で定める. 行列 P の第 j 列は最小消去多項式候補 $\pi'_{A,j}(\lambda)$ の指数部を表すことになる.

さて, $\rho_{1,j} = m_1, \rho_{2,j} = m_2, \dots, \rho_{q,j} = m_q$ なる場合は, 明らかに $\pi'_{A,j}(\lambda) = \pi_{A,j}(\lambda)$ となるが, それ以外の場合に最小消去多項式候補 $\pi'_{A,j}(\lambda)$ が最小消去多項式 $\pi_{A,j}(\lambda)$ と一致するかどうかを判定するには, まず, $\pi'_{A,j}(A)e_j$ を計算する必要がある. 計算結果 $\xi_j = \pi'_{A,j}(A)e_j$ が零ベクトルであれば, この最小消去多項式候補が真の最小消去多項式であることが確かめられたことになる. ξ_j が(たまたま運悪く) 零ベクトルでない場合には, 行列 A のベクトル ξ_j に関する最小消去多項式 $\pi_{A,\xi_j}(\lambda)$, 即ち, イデアル $\{p(\lambda) \mid p(A)\xi_j = 0\}$ の monic な生成元を求め, その因数分解

$$\pi_{A,\xi_j}(\lambda) = f_1(\lambda)^{d_{j,1}} f_2(\lambda)^{d_{j,2}} \dots f_q(\lambda)^{d_{j,q}}$$

を用いて行列 P の第 j 列の各成分 $\rho_{p,j}$ を $\rho_{p,j} + d_{j,p}$ に更新することで、最小消去多項式の指数部を構成することができる。

しかし、これらの計算を全ての $j \in I_0 = \{j \mid (\rho_{1,j}, \rho_{2,j}, \dots, \rho_{q,j}) \neq (m_1, m_2, \dots, m_q)\}$ に対し行うとかなりの計算量になる。従って、この計算を分割し並列に処理することが望まれる。幸い、ベクトル ξ_j の計算は各列毎、独立に行える。あらかじめ指定された分割数 ν に応じ、 I_0 を、計算の負荷がなるべく均等になるように $I_0 = I_1 \cup I_2 \cup \dots \cup I_\nu$ と分割し、各 $I_i, i = 1, 2, \dots, \nu$ において、

$$\xi_j = \pi'_{A,j}(A)\mathbf{e}_j, \quad j \in I_i$$

なる計算を行わせることで計算を並列化させることが考えられる。計算量の見積もりとして、ここでは

$$D_0 = \sum_{p,j \in I_0} \rho_{p,j}$$

を用いる事を提案する。 $\sum_{p,j \in I_i} \rho_{p,j}$ がほぼ D_0/ν となるように I_0 を I_1, I_2, \dots, I_ν に分割することで、計算の負荷をほぼ均等に分散させることができる。

以上が、本稿で提案する最小消去多項式候補および最小消去多項式の計算法である。最小消去多項式候補を効率的に構成できる点に留意されたい。前の節でも述べたように、ひとたび最小消去多項式 $\pi_{A,j}(\lambda), j = 1, 2, \dots, n$ を得れば、スペクトル分解に用いる最小消去多項式 $\pi_{A,J_p}(\lambda), p = 1, 2, \dots, q$ を直ちに構成することができる。本稿では触れないが、最小消去多項式は、スペクトル分解行列の計算を並列化する際や一般固有ベクトル空間を計算する際にも重要な役割を果たす。

4 レゾルベントの主要部

この節では、レゾルベント

$$(\lambda E - A)^{-1} E_{J_p} = \frac{1}{\pi_{A,J_p}(\lambda)} \Psi_{J_p}(A, \lambda) E_{J_p}$$

の極における主要部に注目し、主要部をスペクトル分解の計算が容易となるような形に表現することを考える。

最小消去多項式 $\pi_{A,J_p}(\lambda)$ の因数分解

$$\pi_{A,J_p}(\lambda) = f_1(\lambda)^{r_{J_p,1}} f_2(\lambda)^{r_{J_p,2}} \dots f_q(\lambda)^{r_{J_p,q}}$$

に対し、 $l_p = r_{J_p,p}$ とおき、 $\pi_{A,J_p}(\lambda)$ の $f_p(\lambda)$ 以外の因子の積を $g_{J_p}(\lambda)$ とおく。この時、

$$\pi_{A,J_p}(x) - \pi_{A,J_p}(y) = (f_p(x)^{l_p} - f_p(y)^{l_p})g_{J_p}(x) + f_p(y)^{l_p}(g_{J_p}(x) - g_{J_p}(y))$$

より、

$$\psi_{J_p}(x, y) = \frac{f_p(x)^{l_p} - f_p(y)^{l_p}}{x - y} g_{J_p}(x) + f_p(y)^{l_p} \frac{g_{J_p}(x) - g_{J_p}(y)}{x - y}$$

を得る. ここで, 2変数多項式 $\phi_{f_p}^{(l_p)}(x, y)$, $\phi_{g_{J_p}}(x, y)$ を

$$\phi_{f_p}^{(l_p)}(x, y) = \frac{f_p(x)^{l_p} - f_p(y)^{l_p}}{x - y}, \quad \phi_{g_{J_p}}(x, y) = \frac{g_{J_p}(x) - g_{J_p}(y)}{x - y}$$

で定めると,

$$\frac{1}{\pi_{A, J_p}(\lambda)} \Psi_{J_p}(A, \lambda) = \frac{1}{f_p(\lambda)^{l_p} g_{J_p}(\lambda)} \phi_{f_p}^{(l_p)}(A, \lambda E) g_{J_p}(A) + \frac{1}{g_{J_p}(\lambda)} \phi_{g_{J_p}}(A, \lambda E)$$

となる. 第2項は $f_p(\alpha) = 0$ なる $\lambda = \alpha$ において正則であることから, 因子 $f_p(\lambda)$ に対するスペクトル分解を求めるには, 行列

$$\frac{1}{f_p(\lambda)^{l_p} g_{J_p}(\lambda)} \phi_{f_p}^{(l_p)}(A, \lambda E) g_{J_p}(A) E_{J_p}$$

のみを考えればよいことが分かる. ここで, 行列の係数部分にあたる有理関数の部分分数分解を

$$\frac{1}{f_p(\lambda)^{l_p} g_{J_p}(\lambda)} = \frac{s_{J_p}(\lambda)}{f_p(\lambda)^{l_p}} + \frac{t_{J_p}(\lambda)}{g_{J_p}(\lambda)}$$

とすると, $\frac{t_{J_p}(\lambda)}{g_{J_p}(\lambda)}$ が $f_p(\lambda) = 0$ 上正則であることから, スペクトル分解の計算は行列

$$W_{J_p}(\lambda) = \frac{s_{J_p}(\lambda)}{f_p(\lambda)^{l_p}} \phi_{f_p}^{(l_p)}(A, \lambda E) g_{J_p}(A) E_{J_p}$$

の極 α におけるローラン展開の1位の係数行列と2位の係数行列を求める問題に帰着されることが分かる. さらに,

$$\phi_{f_p}^{(l_p)}(x, y) = \phi_{f_p}^{(1)}(x, y) (f_p(x)^{l_p-1} + f_p(x)^{l_p-2} f_p(y) + f_p(x)^{l_p-3} f_p(y)^2 + \cdots + f_p(y)^{l_p-1})$$

より

$$\frac{1}{f_p(\lambda)^{l_p}} \phi_{f_p}^{(l_p)}(A, \lambda E) = \sum_{\ell=1}^{l_p} \frac{1}{f_p(\lambda)^\ell} \phi_{f_p}^{(1)}(A, \lambda E) f_p(A)^{\ell-1}$$

を得るので, 先程の行列 $W_{J_p}(\lambda)$ は

$$W_{J_p}(\lambda) = \sum_{\ell=1}^{l_p} \frac{s_{J_p}(\lambda)}{f_p(\lambda)^\ell} \phi_{f_p}^{(1)}(A, \lambda E) f_p(A)^{\ell-1} g_{J_p}(A) E_{J_p}$$

と表される. ここで, $\phi_{f_p}^{(1)}(A, \lambda E)$ は

$$\phi_{f_p}^{(1)}(x, y) = \frac{f_p(x) - f_p(y)}{x - y}$$

であることから, 行列 $\phi_{f_p}^{(1)}(A, \lambda E)$ を λ の多項式として展開した時, 各 λ^k の係数行列は, ホーナー法で容易に計算できることに注意しておこう.

注意 論文 [4] に与えた方法で部分分数分解を行うと $s_{J_p}(\lambda)$ を $f_p(\lambda)$ の幂で展開した complete な部分分数分解を直接求めることができる. この結果を利用すると, スペクトル分解を求める際の計算の効率化を図れる.

さてここで, この節で行った式変形と同じ変形をレゾルベント

$$(\lambda E - A)^{-1} = \frac{\Psi(A, \lambda)}{\pi_A(\lambda)}$$

の主要部に対し, 行列の最小多項式 $\pi_A(\lambda)$ の因数分解

$$\pi_A(\lambda) = f_1(\lambda)^{l_1} f_2(\lambda)^{l_2} \cdots f_q(\lambda)^{l_q}$$

を用いて行ってみる. そのために, $g_p(\lambda)$ を

$$g_p(\lambda) = f_1(\lambda)^{l_1} f_2(\lambda)^{l_2} \cdots f_{p-1}(\lambda)^{l_{p-1}} f_{p-1}(\lambda)^{l_{p+1}} \cdots f_q(\lambda)^{l_q}$$

で定める (第3節では, 特性多項式に対し同様な多項式を導入し, 同じ記号 $g_p(\lambda)$ を使っているが混乱することは無いと思う). 部分分数分解を

$$\frac{1}{f_p(\lambda)^{l_p} g_p(\lambda)} = \frac{s_p(\lambda)}{f_p(\lambda)^{l_p}} + \frac{t_p(\lambda)}{g_p(\lambda)}$$

とおく. $W_{J_p}(\lambda)$ に対応する行列を $W_p(\lambda)$ と置くと, $W_p(\lambda)$ は次で与えられる.

$$W_p(\lambda) = \sum_{\ell=1}^{l_p} \frac{s_p(\lambda)}{f_p(\lambda)^\ell} \phi_{f_p}^{(1)}(A, \lambda E) f_p(A)^{\ell-1} g_p(A)$$

W_p, W_{J_p} は共に, 因子 $f_p(\lambda) = 0$ 上, レゾルベント $(\lambda E - A)^{-1}$ と同じ主要部を持っている. 従って, どちらを使っても, $f_p(\alpha) = 0$ なる α に対するスペクトル分解行列 P_α, D_α を求めることができることになる. しかし, W_p を用いてスペクトル分解行列を計算する場合によっては W_{J_p} を用いた場合に比べ, 計算量がかなり多くなる. このことを見るために $g_p(A)$ と $g_{J_p}(A)$ の計算量を比較してみよう. 多項式 $g_p(\lambda), g_{J_p}(\lambda)$ はそれぞれ

$$g_p(\lambda) = f_1(\lambda)^{l_1} f_2(\lambda)^{l_2} \cdots f_{p-1}(\lambda)^{l_{p-1}} f_{p-1}(\lambda)^{l_{p+1}} \cdots f_q(\lambda)^{l_q}$$

$$g_{A, J_p}(\lambda) = f_1(\lambda)^{r_{J_p, 1}} f_2(\lambda)^{r_{J_p, 2}} \cdots f_{p-1}(\lambda)^{r_{J_p, p-1}} f_{p-1}(\lambda)^{r_{J_p, p+1}} \cdots f_q(\lambda)^{r_{J_p, q}}$$

で与えられるので $g_p(\lambda)$ は $g_{J_p}(\lambda)$ により割り切られる. 従って, $g_p(A)$ を求める計算の方が $g_{J_p}(A)$ を求める計算より計算量が多いことが直ちにわかる. 次に, 多項式 $s_p(\lambda)$ と $s_{J_p}(\lambda)$ に注目する. この2つの多項式は部分分数分解

$$\frac{1}{f_p(\lambda)^{l_p} g_p(\lambda)} = \frac{s_p(\lambda)}{f_p(\lambda)^{l_p}} + \frac{t_p(\lambda)}{g_p(\lambda)}$$

$$\frac{1}{f_p(\lambda)^{l_p} g_{J_p}(\lambda)} = \frac{s_{J_p}(\lambda)}{f_p(\lambda)^{l_p}} + \frac{t_{J_p}(\lambda)}{g_{J_p}(\lambda)}$$

の分子にあたる多項式であり, 基本的には拡張ユークリッドの互助法を用いることで求めることができるものである. 従って, 両者とも分母, 分子ともかなり桁数のおおきな整数からなる有理数を係数に持つことになる. ここでも, $g_p(\lambda)$ の方が $g_{J_p}(\lambda)$ より多くの因子を持つことから, 多項式 $s_p(\lambda)$ の係数に表れる有理数の方が, $s_{J_p}(\lambda)$ の係数に表れる有理数より, 分母, 分子ともに桁数が (相当) 多くなる可能性が高いことが分かる.

第2節で既に述べたことを再び繰り返すことになるが, 以上のことから, 「レゾルベントの概念を用いて行列のスペクトル分解を求める際は, $W_p(\lambda)$ を計算に用いるより, W_{J_p} を用いて計算する方が, スペクトル分解行列自体を求める際の計算量が少ない」ことが分かる.

5 微分作用素の利用

前の節で行った式変形により, 因子 $f_p(\lambda)$ に対する行列 A のスペクトル分解行列を求めることは, 有理関数

$$\frac{s_{J_p}(\lambda)}{f_p(\lambda)^l} \lambda^k, \quad l = 1, 2, \dots, l_p, k = 0, 1, \dots, \deg f_p - 1$$

の極におけるローラン展開の1位および2位の係数を求める問題に帰着された.

さて, 1999年に京都大学数理解析研究所で開かれた短期共同研究「積分核の代数解析的研究」において, holonomic な定数係数線形偏微分方程式系と Grothendieck duality というタイトルで研究発表を行った ([13]). その折に, 代数的局所コホモロジーの概念を用いることで, 一変数有理関数の留数値を求める計算法を3通り与えた. その後, これら3通りの計算法のうち, Noether 作用素と呼ばれる微分作用素を用いた方法が最も計算効率が良い計算アルゴリズムを与えることが判明した ([4]). ここでは, この Noether 作用素を用いることで, 留数値とローラン展開の2位の係数を求めることが可能となることを示す.

有理関数 $\frac{1}{f(\lambda)^\ell}$ に対し,

$$T = \left(-\frac{d}{d\lambda}\right)^{\ell-1} t_0(\lambda) + \left(-\frac{d}{d\lambda}\right)^{\ell-2} t_1(\lambda) + \dots + \left(-\frac{d}{d\lambda}\right) t_{\ell-2}(\lambda) + t_{\ell-1}(\lambda)$$

なる形の $\ell-1$ 階の微分作用素 T であり, $\frac{1}{f(\lambda)^\ell}$ と $T\left(\frac{f'(\lambda)}{f(\lambda)}\right)$ の差

$$p(\lambda) = \frac{1}{f(\lambda)^\ell} - T\left(\frac{f'(\lambda)}{f(\lambda)}\right)$$

が多項式となるものが存在する. ただし, ここで $t_0(\lambda), t_1(\lambda), \dots, t_{\ell-1}(\lambda)$ は多項式ではなく, これらの多項式が定める零階の微分作用素, つまり掛け算作用素を意味するものとしている.

補足 この微分作用素 T のことを Noether 作用素と呼ぶ ([1], [7]). Noether 作用素については, D-加群の理論や概念を用いて理解するのが本質的であると思われるが, ここでは, 微

分作用素 T 自体に関する説明は省略する. 興味ある読者は [10],[11],[12],[14] 等を参照されたい.

さて, $\lambda = \alpha$ は多項式 $f(\lambda)$ の零点であるとし, 有理関数 $\frac{h(\lambda)}{f(\lambda)^\ell}$ の極 α における留数値

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_{\gamma_\alpha} \frac{h(\lambda)}{f(\lambda)^\ell} d\lambda$$

を考えると,

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_{\gamma_\alpha} \frac{h(\lambda)}{f(\lambda)^\ell} d\lambda = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\gamma_\alpha} h(\lambda) \left\{ T\left(\frac{f'(\lambda)}{f(\lambda)}\right) + p(\lambda) \right\} d\lambda$$

となるが, $p(\lambda)$ が多項式であり, 特に正則であることから,

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_{\gamma_\alpha} \frac{h(\lambda)}{f(\lambda)^\ell} d\lambda = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\gamma_\alpha} h(\lambda) \left\{ T\left(\frac{f'(\lambda)}{f(\lambda)}\right) \right\} d\lambda$$

を得る (ここで, γ_α は α の周りの十分小さなサイクルを表す). 微分作用素 T の形式随伴作用素 T^* は

$$t_0(\lambda) \frac{d^{\ell-1}}{d\lambda^{\ell-1}} + t_1(\lambda) \frac{d^{\ell-2}}{d\lambda^{\ell-2}} + \cdots + t_{\ell-1}(\lambda)$$

で与えられるので, 部分積分することで, 与式は

$$\frac{1}{2\pi i} \oint \left\{ t_0(\lambda) \frac{d^{\ell-1}h(\lambda)}{d\lambda^{\ell-1}}(\lambda) + t_1(\lambda) \frac{d^{\ell-2}h(\lambda)}{d\lambda^{\ell-2}}(\lambda) + \cdots + t_{\ell-2}(\lambda) \frac{dh(\lambda)}{d\lambda}(\lambda) + t_{\ell-1}(\lambda) h(\lambda) \right\} \frac{f'(\lambda)}{f(\lambda)} d\lambda$$

と変形される. いま, $f(\lambda)$ の零点を $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{\deg f}$ とおくと

$$\frac{f'(\lambda)}{f(\lambda)} = \frac{1}{\lambda - \alpha_1} + \cdots + \frac{1}{\lambda - \alpha_{\deg f}}$$

となることから, $\lambda = \alpha_i$ における上記の留数値は

$$t_0(\alpha_i) \frac{d^{\ell-1}h}{d\lambda^{\ell-1}}(\alpha_i) + t_1(\alpha_i) \frac{d^{\ell-2}h}{d\lambda^{\ell-2}}(\alpha_i) + \cdots + t_{\ell-1}(\alpha_i) h(\alpha_i)$$

で与えられることが直ちに従う. 以上のことは, 次のようにまとめることが出来る.

Noether 作用素 T に対し, 微分作用素 R_1 を,

$$R_1 = t_0(\lambda) \frac{d^{\ell-1}}{d\lambda^{\ell-1}} + t_1(\lambda) \frac{d^{\ell-2}}{d\lambda^{\ell-2}} + \cdots + t_{\ell-1}(\lambda)$$

で定める. 多項式 $h(\lambda)$ に微分作用素 R_1 を施すことで得られる多項式 $R_1 h(\lambda)$ を $f(\lambda)$ で割り, その余りを $r_1(\lambda)$ とおく. このとき,

$$r_1(\alpha) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\gamma_\alpha} \frac{h(\lambda)}{f(\lambda)^\ell} d\lambda$$

が成り立つ.

さて, 次に微分作用素 R_2 を

$$R_2 = (\ell - 1)t_0(\lambda) \frac{d^{\ell-2}}{d\lambda^{\ell-2}} + (\ell - 2)t_1(\lambda) \frac{d^{\ell-3}}{d\lambda^{\ell-3}} + \cdots + t_{\ell-2}(\lambda)$$

で定める. 多項式 $h(\lambda)$ に微分作用素 R_2 を施すことで得られる多項式 $R_2 h(\lambda)$ を $f(\lambda)$ で割り, その割り算の余りを $r_2(\lambda)$ とおく, このとき, $\frac{h(\lambda)}{f(\lambda)^\ell}$ の極 α におけるローラン展開の 2 位の係数は, $r_2(\alpha)$ で与えられる. この公式は, 微分作用素環での初等的な計算を行うことで導くことが出来るが, ここでは割愛することにする.

以上のことから, 微分作用素を用いることで, 行列のスペクトル分解行列を固有値の多項式として表現する式を求めるアルゴリズムが構成可能であることが分かる.

補足 Noether 作用素は, 基本的には論文 [4] に与えた方法で求めることができるが, [8] で示したように, 論文 [14] において導出した計算方法の方がはるかに効率がよい. [15] で与えた計算手法と組み合わせることで, 更に効率よく, Noether 作用素を求めることが可能となった. これらのアルゴリズムは数式処理システム Risa/Asir に実装してある ([9]).

参考文献

- [1] L. Ehrenpreis: Fourier Analysis in Several Complex Variables, Wiley-Interscience, 1970.
- [2] F. H. Gantmacher, The theory of Matrices, Chelsia (1959).
- [3] 飯塚由貴恵, 田島慎一: 行列のスペクトル分解アルゴリズムについて – 最小多項式が複数の重複因子から成る場合 –, 京都大学数理解析研究所講究録掲載予定.
- [4] 加藤涼加, 田島慎一, 有理関数のローラン展開アルゴリズムと代数的局所コホモロジー, 京都大学数理解析研究所講究録, **1395** (2004), 50–56.
- [5] T. Kato, A Short Introduction to Perturbation Theory for Linear Operators, Springer-Verlag, 1982.
- [6] 小原功任, 田島慎一, 行列のスペクトル分解・固有ベクトルの分散計算, 京都大学数理解析研究所講究録, **1666** (2009), 65–68.
- [7] V.P. Palamodov: A remarks on the exponential representation of solutions of differential equations with constant coefficients (Russian), Mat. Sbornik **76 (118)** (1968), 417–434.
- [8] 庄司卓夢, 田島慎一: 高速留数計算アルゴリズム, 京都大学数理解析研究所講究録 **1456** (2005), 133–143.
- [9] 庄司卓夢, 田島慎一: 一変数代数的局所コホモロジー類に対する Risa/Asir 用パッケージ taji_alc, Risa/Asir Journal 2 (2007), 1–32.

- [10] 田島慎一：代数的局所コホモロジー類のローラン展開と L. Ehrenpreis の Noether 作用素, 京都大学数理解析研究所講究録 **1138** (2000), 87–95.
- [11] 田島慎一, 中村弥生：Hermite-Jacobi 再生核の計算代数解析, 京都大学数理解析研究所講究録 **1352** (2003), 1–10.
- [12] 田島慎一：Noether 作用素と多変数留数計算アルゴリズム, 京都大学数理解析研究所講究録 **1431** (2005), 123–136.
- [13] 田島慎一, Holonomic な定数係数線形偏微分方程式系と Grothendieck duality, 京都大学数理解析研究所講究録, **1509** (2006), 1–23.
- [14] 田島慎一, 一変数留数計算アルゴリズムについて, 京都大学数理解析研究所講究録, **1509** (2006), 24–50.
- [15] 田島慎一：剰余体 $K[x]/\langle f \rangle$ における逆冪計算, 京都大学数理解析研究所講究録 **1514** (2006), 171–175.
- [16] 田島慎一, 飯塚由貴恵：行列のスペクトル分解アルゴリズムについて, 京都大学数理解析研究所講究録, **1666** (2009), 49–56.
- [17] 田島慎一, 樋口水紀, レゾルベントを用いた固有ベクトル計算, 京都大学数理解析研究所講究録, **1666** (2009), 57–64.